数理解析研究所講究録
1119巻 1999年 18-25

Symplectic Runge-Kutta 公式の最近の話題について

徳島大学・総合科学部　前田茂

1　初めに

Symplectic Runge-Kutta (以下、RK) 公式の存在が示され [1] てから10年近くになるが、この間の研究の進展は目覚ましく、今でも多岐に亘る研究が進められている。symplectic 性の条件を緩めた、linearly symplectic RK公式も1つの研究テーマである。linearly symplectic RK公式とは、線形 Hamilton 系に適用した際、線形 symplectic 写像を与えるというもので、非線形 Hamilton 系に適用しても必ずしも symplectic 写像を与えない。しかし、条件が緩和された分、該当する公式の範囲は広まり、対称公式など別の意味で力学的な性質を持つ離散化公式がその範疇に含まれる。

ところで、symplectic integrator に通有とされる「**良好な軌道再現性**」の観点から、linearly symplectic RK公式を限定することを考えると、実用的な公式はかなり絞られる筈で、実は symplectic RK公式に限定されるのではないか？という疑問が、本研究の発端である。その予測はある意味で当たっていた。

2　RK公式とは

初めにRK公式について復習する。

s段RK公式とは、s^2+2s 個のパラメータ

$$
\begin{aligned}
A &= (a_{ij}) \ \text{(Runge Kutta 行列)}, \\
b &= (b_i) \ \text{(重みベクトル)}, \qquad c=(c_i) \ \text{(abcissa)}
\end{aligned}
$$

を用いて、常微分方程式系 $\dfrac{dx}{dt}=f(t,\,x)$ を

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + h\sum_{i=1}^{s} b_i k_i, \\
k_i &= f(t_n + c_i h,\, x_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij}k_j) \quad (1\le i\le s)
\end{aligned}
$$

と離散化する手続きをいう。各ＲＫ公式に固有な量を２つ挙げる [3]。

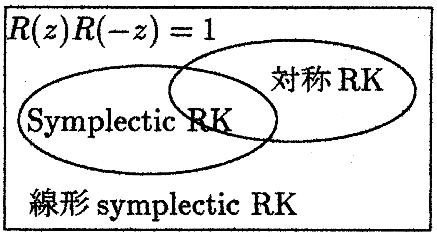
(1) 安定性関数。 $R(z) = \dfrac{|I - z(A + eb^T)|}{|I - zA|}$, $e = \begin{pmatrix} 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \end{pmatrix}$

線形系 $dx/dt = Ux$ 離散化する際、$x_{n+1} = R(hU)x_n$ となる。

(2) 対称行列 $M = (m_{ij})$。 $m_{ij} = a_i b_{ij} + a_j b_{ji} - b_i b_j$。
Ｂ安定性、代数安定性、symplectic 性の条件に現れる。

3 symplectic 性に関係するＲＫ公式達

(1) 線形 symplectic 公式 [5]。 $R(z)R(-z) = 1$ i.e. 虚軸上で $|R(z)| = 1$。
(2) 対称ＲＫ公式 [4]。 ある置換行列 P によって、
$PAP^{-1} + A = eb^T$, $Pb = b$。
離散化写像 ϕ_h が、$\phi_{-h} = \phi_h^{-1}$ を満たす。
(3) symplectic ＲＫ公式 [1]。 $M = 0$。



これらの公式を実際に用いる際、**良好な軌道再現性を有することが望ましい**。というのは、こういう長所こそ symplectic integrator を敢えて用いる理由だから。そこで、軌道の再現性に関係する既知の安定性の概念を幾つか列挙する [3]。

(1) Ａ安定。 $Re(z) \le 0$ のとき、$|R(z)| \le 1$。
元来は固い系の積分に適。
$M = 0$ の下では、線形系の軌道再現に有力。
(2) Ｂ安定。 元来は散逸系の積分に適。
$M = 0$ の下では、互いに離れていく、近づいていく軌道の再現に適。
(Hundsdorfer & Spijker の意味で) 既約な公式では、次の代数安定性と同値。

(3) 代数安定。 $M \geq 0$, かつ $b \geq 0$。
(Dahlquist & Jeltsch の意味で) 既約な公式では、第２式は $b > 0$。

一般に、安定性間には (symplectic 性とは無関係に以下の関係があることが知られている。

(1) 代数安定性 $\Longrightarrow$ A安定 & B安定
(2) (Hundsdorfer & Spijker の意味で) 既約な公式では、代数安定 $\Longleftrightarrow$ B安定

4 Hairer & Leone による最近の結果と関連事項

まず、Hairer & Leone が最近出した重要な結果を掲げる。

Proposition 1 *既約かつ $M = 0$ を満たす RK 公式の $R(z)$ の左半平面上にある極の数は、負の重み成分 b_j の個数に等しい [2]。*

注：線形 symplectic 公式がA安定であるための必要十分条件は、$R(z)$ の極が左半平面にないこと [6]。

上の結果は、symplectic ＲＫ公式がA安定であるためには、b_i がすべて正であることが必要十分であることをいっている。
従って、既約な symplectic ＲＫ公式では、３種類の安定性が同値、すなわち

(4.1) A安定性 $\Longleftrightarrow$ 代数安定性 $\Longleftrightarrow$ B安定性

であることが分かる。そして、実用面では「重みベクトル b_i がすべて正」のものを使うべきことが示唆される。では、条件を緩めた線形 symplectic ＲＫ公式ではどうだろうか、という疑問が生じる。実は、

線形 symplectic ＲＫ公式では、(4.1) のような関係は成立しない。

２例を挙げる

(1) A安定であって、代数安定でない公式例 (実は対称公式)。

$$\begin{array}{c|cc} 1/2+(\alpha-\beta) & 1/4+\alpha & 1/4-\beta \\ 1/2-(\alpha-\beta) & 1/4+\beta & 1/4-\alpha \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \qquad 0 < |\alpha| < |\beta|,$$

$$R(z) = \frac{1+z/2+(\beta^2-\alpha^2)z^2}{1-z/2+(\beta^2-\alpha^2)z^2}, \qquad M = \alpha\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(2) A安定であっても、重み成分に負のものがある例。

$$\begin{array}{cc} 5/4 & -9/4 \\ 3/4 & -3/4 \\ \hline -1/2 & 3/2 \end{array}\text{。}$$

$$R(z) = \frac{1+\frac{1}{2}z+\frac{3}{4}z^2}{1-\frac{1}{2}z+\frac{3}{4}z^2} \text{ の極は、} \frac{1 \pm i\sqrt{11}}{3}\text{。}$$

5 証明したい命題

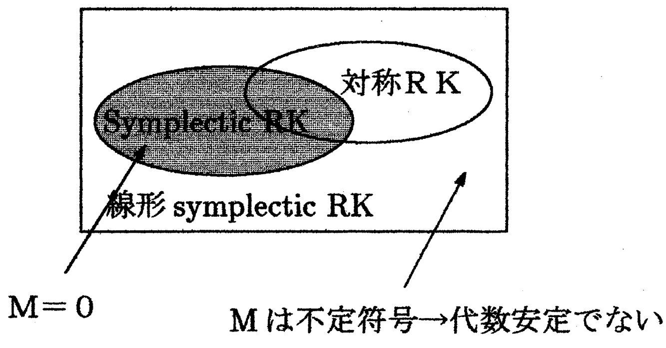
我々は、本節で以下の命題を証明する。証明に用いる道具は [2, 7] で本質的に使われたものである。

Proposition 2 既約な線形 *symplectic* RK公式の M は、*(半)*定符号ではあり得ない。すなわち、

$$M = 0\text{、} \qquad M \text{ は不定符号}$$

のいずれかが成り立つ。

この命題を認めると、該当公式間の行列 M 達は下図のようになる。



つまり、**線形 symplectic 公式で代数安定なものは、実は symplectic であるものに限る**ことが従う。些か長いが、以下に証明を与える。

Proposition 2 の証明 (概略)
(1) 行列 X と $R(z)$

多項式 $P(z)=|I-z(A-eb^T)|$, $Q(z)=|I-zA|$ を定めると、既約な線形 symplectic という仮定から、P, Q は共通零点をもたない s 次多項式で、

$$R(z)=P(z)/Q(z), \qquad P(z)=Q(-z)$$

となる。行列 X と、X 用いて作る有理式 $S(z)$ を次で定義する。

$$X=A-\frac{1}{2}eb^T, \qquad S(z)=z\cdot b^T(I-zX)^{-1}e.$$

すると直ちに、

(5.1)
$$R(z)=\frac{1+\frac{1}{2}S(z)}{1-\frac{1}{2}S(z)}.$$

更に、多項式 $f(z)$, $g(z)$ を

(5.2)
$$S(z)=z\frac{g(z)}{f(z)}, \qquad f(0)=g(0)=1,$$

で定めると、f, g も共通零点をもたない。簡単な考察から以下が従う。

(1)

(5.3)
$$P(z)=f(z)+\frac{1}{2}zg(z), \qquad \boxed{Q(z)=f(z)-\frac{1}{2}zg(z)}.$$

(2) $f(z)=|I-zX|$, $\qquad g(z)=\begin{vmatrix} I-zX & e \\ -b^T & 0 \end{vmatrix}$。

(3) s が偶数のとき、$deg\ f=s$, $deg\ g\leq s-2$。
s が奇数のとき、$deg\ f=deg\ g=s-1$。

(2) s 次多項式 $K_\lambda(z)$ とベクトル $\phi(z)$

まず、λ を (複素) 定数として、多項式

(5.4)
$$K_\lambda(z)=f(z)-\lambda zg(z)$$

を定める。$\lambda\neq 0$ のとき、$K_\lambda(z)$ は s 次である。次に、$I-zX$ の余因子行列を $\Delta(z)$ とし、$\phi(z)=\Delta(z)e$ を導入する。すなわち、

(5.5)
$$\phi(z)=|I-zX|(I-zX)^{-1}e=f(z)(I-zX)^{-1}e.$$

$\phi(z)$ の成分は、高々 $s-1$ 次の多項式で、つねに $\phi(z)\neq 0$。そして、

$$K_\lambda(z)e=(I-z(X+\lambda eb^T))\phi(z).$$

Lemma 1 $z_1,\ \cdots,\ z_t$ を $K_\lambda(z)=0$ の相異なる根とする。

(1) $z_j \neq 0 \quad j=1,\ \cdots,\ t$。
(2) $\phi(z_1),\ \cdots,\ \phi(z_t)$ は1次独立。

$(\because)$ *(1)* は $f(0)\neq 0$ より。*(2)* は $1/z_j$ は $X+\lambda e b^T$ の固有値、$\phi(z_j)$ は固有ベクトルであることから。

ある s 次行列 L によって、$\phi(z)$ が

$$\phi(z) = L \begin{pmatrix} 1 \\ z \\ \cdot \\ \cdot \\ z^{s-1} \end{pmatrix}$$

とかけることに注意すると、一般に

$$(\phi(z_1),\ \cdots,\ \phi(z_s)) = L \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ z_1 & z_2 & \cdots & z_s \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ (z_1)^{s-1} & (z_2)^{s-1} & \cdots & (z_s)^{s-1} \end{pmatrix}.$$

従って、ある λ に対して、$\underline{K_\lambda(z)=0 \text{ が } s \text{ 個の単根}}$を持てば、$L$ は正則になる。ところが、$f,\ g$ は共通零点を持たないのでこのような λ は必ず存在する。その結果、

Lemma 2 $z_1,\ \cdots,\ z_s$ を相異なる任意の複素数とするとき、$\phi(z_1),\ \cdots,$ $\phi(z_s)$ は C^s の基底をなす。

(3) 条件 $R(z)R(-z)=1$ の言い換え

線形 symplectic 性の条件

$$R(z)R(-z)=1 \tag{5.6}$$

は、直ちに次のように言い換えられるが、

$$f(-z)=f(z), \quad g(-z)=g(z)$$

もっと重要な言い換えを導く。$z,\ w$ を任意の複素数とするとき、恒等式

$$(5.7)\qquad f(z)wg(w)+f(w)zg(w)=(z+w)\phi(w)^*B\phi(z)+zw\phi(w)^*M\phi(z)$$

が成り立つ ($\leftarrow f(z)e=(I-zX)\phi(z),\quad g(z)=b^T\phi(z)$)。(5.6) は、「虚軸上で $|R(z)|=1$」であることと同値。
ところが、$R(z)$ の表現(5.1) から

$$\begin{aligned}|R(z)|=1 \quad &\Longleftrightarrow \quad Re(S(z))\equiv Re\left(z\frac{g(z)}{f(z)}\right)=0\\ &\Longleftrightarrow \quad f(z)\overline{z}g(\overline{z})+f(\overline{z})zg(z)=0\end{aligned}$$

である。従って、恒等式 (5.7) で $w=\overline{z}$ とおくことで、

Lemma 3 RK公式が線形 *symplectic* であるための必要十分条件は、任意の純虚数 z に対して下式が成り立つこと。

$$\phi(z)^*M\phi(z)=0.$$

さて、結論を導く段階にきた。相異なる s 個の純虚数 $z_1,\ \cdots,\ z_s$ を任意に選ぶと、補題2から、$\phi(z_1),\ \cdots,\ \phi(z_s)$ は C^s の基底をなす。ところが、上の補題から $j=1,\ \cdots,\ s$ に対して、$\phi(z_j)^*M\phi(z_j)=0$ が成り立つため、もし $M\neq 0$ ならば (半) 定符号ではあり得ない。「証終」

Hairer & Leone による命題の証明も、恒等式(5.7) に基づいていることを付記する。

参考文献

[1] J.M.Sanz-Serna, Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems, BIT, 28(1988), 877-883.

[2] E.Hairer & P.Leone, Some properties of symplectic Runge-Kutta methods, to appear.

[3] K.Dekker & J.G.Verwer, Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations, Elsevier, North-Holland, 1984.

[4] H.J.Stetter, Analysis of discretization methods for ordinary differential equations, Springer, Berlin, 1973.

[5] K.Feng, On difference schemes and symplectic geometry, Proceedings of the 5th International Stmposium on Differential Geometry and Differential Equations, Aug., 1984, Beijin.

[6] 前田茂、シンプレクテック写像の応用について一ハミルトン系の離散版、応用数理、Vol. 8、No. 3、SEP(1998)、30-39。

[7] E.Hairer & G.Wanner, Solving ordinary differential equations II, Springer, Berlin, 1991.